

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОХИМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ ЭЛЕКТРОДНЫХ МАТЕРИАЛОВ НА ОСНОВЕ 3D-РЕКОНСТРУКЦИИ МИКРОСТРУКТУРЫ

Фарленков А.С.⁽¹⁾, Ананьев М.В.⁽²⁾

⁽¹⁾ Уральский федеральный университет

620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

⁽²⁾ Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН

620990, г. Екатеринбург, ул. Академическая, д. 20

Микроструктура функциональных материалов является определяющим фактором кинетики процессов, происходящих при работе электрохимических устройств, и зависит от технологии производства материала, вида сырья, степени установления фазового равновесия, кинетики фазовых превращений, роста зерен, способности к спеканию и др. Чаще всего источником информации о микроструктуре являются изображения, полученные методом растровой электронной микроскопии (РЭМ). Для оценки ряда параметров микроструктуры, которые имеют прямую взаимосвязь с физико-химическими свойствами функциональных материалов, недостаточно только анализа изображений сечений или поверхности материалов. Существует ряд параметров микроструктуры, которые можно рассчитать только из трехмерной модели: протяженность трехфазных (ТФГ) и межфазных (МФГ) границ, доля активных ТФГ, открытых пор и т.п.

В данной работе на примере электродных материалов LSM—YSZ была проведена 3D-реконструкция микроструктуры, на основе анализа изображений РЭМ с использованием оригинального алгоритма [1]. В качестве параметров сравнения применяли доли сегментов, относящихся к фазам LSM, YSZ и порам; автокорреляционную функцию и функции распределения размеров фаз и пор. Критерий Колмогорова—Смирнова использовали для проверки однородности функций распределения.

По трехмерной модели рассчитана протяженность ТФГ, определены доли активных ТФГ и открытых пор. С помощью разработанного оригинального программного обеспечения методом Монте-Карло рассчитаны факторы извилистости для пористой структуры и фаз LSM, YSZ в составе композитов.

В работе обсуждаются корреляции между параметрами микроструктуры и физико-химическими свойствами материалов, такими как: коэффициент газопроницаемости, скорость межфазного обмена, коэффициент диффузии кислорода и электропроводность.

Предлагаемый подход может быть полезным при исследовании процессов деградации электрохимических материалов для выбора оптимальных условий формирования и эксплуатации электрохимических устройств, таких как: твердооксидные топливные элементы (ТОТЭ), электрохимические риформеры, электролизеры, сенсоры и др.

Авторы выражают благодарность Поротниковой Н. М., Ерёмину В. А. и Панкратову А. А. за предоставление экспериментальных данных, на основе которых проводилось моделирование.

1. Ананьев М. В., Гаврилюк А. Л. Стохастическое 3D-моделирование микроструктуры твердооксидных топливных элементов // Сборник тезисов 42-й Всероссийской молодежной школы-конференции «Современные проблемы математики», Екатеринбург, 30 января — 6 февраля 2011, с. 276—279.

Работа выполнена при финансовой поддержке грантов РФФИ №12-03-31847/12 и ФЦП №2012-1.3.1-12-000-2006-004, соглашение №8713.

ЭНЕРГОСБЕРЕГАЮЩИЙ СПОСОБ ПОЛУЧЕНИЯ ВЫСОКОДИСПЕРСНОГО ПОРОШКА КАРБИДА ВОЛЬФРАМА

Апакашев Р.А., Руцкая Д.Р., Усова Н.С., Постникова А.С.

Уральский государственный горный университет
620000, г. Екатеринбург, ул. Куйбышева, д. 30

Известны способы получения карбидов тугоплавких металлов различной степени дисперсности, в том числе – карбида вольфрама, основанные на восстановлении вольфрамосодержащего окисленного сырья с одновременной карбидизацией. При получении карбидов по этим способам исходят из соответствующих оксидов, которые карбидизируют с углеродосодержащим материалом при температурах, составляющих 50 - 75 % температуры плавления карбидов. Карбид вольфрама часто получают в обычных печах из смеси металлического вольфрамового порошка и углеродосодержащего материала.

К недостаткам данных способов относится необходимость использования в качестве основного реагента дорогостоящего высокодисперсного порошка вольфрама, а также большое (до 70 часов) время получения, что вместе взятое существенно увеличивает затраты энергии на получение конечного продукта и его себестоимость.

Разработан способ получения высокодисперсного порошка карбида вольфрама, не требующий использования в качестве исходного